Hipoteza ergodyczna

Mariusz Adamski

Plan prezentacji

1. Sformułowanie hipotezy ergodycznej.
2. Średnia czasowa i średnia po zespole.
3. Twierdzenie ergodyczne dla jednej trajektorii.
4. Ergodyczność a całkowalność.

1. Sformułowanie hipotezy ergodycznej.

Hipoteza ergodyczna (gr. $\ddot{\varepsilon}\varrho\gamma o\nu$ – praca rozumiana jako energia, $\delta\delta\acute{o}\varsigma$ – droga) została sformułowana przez Ludwiga Boltzmanna w roku 1871; orzeka ona, że dla niemal wszystkich punktów początkowych, trajektoria układu przebiegnie wiele obszarów przestrzeni fazowej w czasie odpowiadającym typowej skali czasowej doświadczeń laboratoryjnych.

W takim przypadku, jeśli czas spędzony w danym obszarze jest proporcjonalny do jego naturalnej miary prawdopodobieństwa, to układ większość czasu przebywa w obszarach odpowiadających równowagowym wartościom jego parametrów makroskopowych, gdyż te właśnie obszary wypełniają większą część przestrzeni fazowej.

Boltzmann sformułował hipotezę ergodyczną w następujących słowach:

„Duża nieregularność ruchu cieplnego i zmienność sił zewnętrznych działających na ciało stwarza duże prawdopodobieństwo, że atomy w ruchu cieplnym mogą przyjmować wszystkie wartości położeń i pędów zgodnie z ustaloną energią wewnętrzną ciała”.

2. Średnia czasowa i średnia po zespole.

Izolowane układy mechaniczne są odwracalne w czasie i powracające dowolnie blisko stanu początkowego (w myśl twierdzenia Poincarégo). Obserwacje wskazują jednak, że duże układy izolowane najczęściej osiągają stan równowagi termodynamicznej. Jak wyjaśnić powszechne obserwacje bez popadania w sprzeczność z prawami mechaniki?

Wyjaśnienie Boltzmanna biegnie następującym torem:

1. Równowagowa mechanika statystyczna może być sformułowana za pomocą średnich w zespole mikrokanonicznym, przy użyciu miary $\mathrm{d}\mu = \mu(\mathrm{d}S) = \mathrm{d}S/|\operatorname{grad}\mathscr{H}|$, gdzie

$$|\operatorname{grad}\mathscr{H}| = \sqrt{\sum_{i=1}^{2s}\left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial\mathscr{H}}{\partial p_i}\right)^2}$$

   jest gradientem $\mathscr{H}(q,p)$ w $2s$-wymiarowej przestrzeni Γ. Średnia względem zespołu dla funkcji określonej na przestrzeni fazowej $F(\Gamma)$ określona jest jako:

$$\langle F(\Gamma)\rangle = \frac{\int_{\mathscr{H}=\mathscr{E}} \mathrm{d}\mu F(\Gamma)}{\int_{\mathscr{H}=\mathscr{E}} \mathrm{d}\mu}.$$

   Liczba stanów o energii $\mathscr{E}$ wynosi:

$$\Omega(\mathscr{E}) = \int_{\mathscr{H}=\mathscr{E}} \mathrm{d}\mu,$$

   a entropia termodynamiczna $S = k_{\mathrm{B}} \ln \Omega(\mathscr{E})$.

2. Gdyby wykonywać bardzo dokładne laboratoryjne pomiary wybranej wielkości $F(\Gamma_t)$, gdzie Γ_t oznacza punkt w przestrzeni fazowej w chwili t, to otrzymane wyniki podlegałyby gwałtownym fluktuacjom wokół wolnozmiennej wartości „średniej”. Możemy jednak utożsamić wartość zmiennej termodynamicznej pojedynczego układu ze średnią względem czasu

$$\bar{F}(\Gamma) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T F(\Gamma_t)\mathrm{d}t.$$

Boltzmann zdał sobie sprawę, że mógłby utożsamić średnią względem zespołu mikrokanonicznego ze średnią po nieskończenie długim czasie, tzn.

$$\bar{F}(\Gamma) = \langle F(\Gamma) \rangle,$$

gdyby jednocześnie przyjął hipotezę, że trajektoria prawie każdego typowego punktu na powierzchni o ustalonej energii przebywa jednakowo długo w obszarach o tej samej mierze w przestrzeni fazowej. Hipotezę tą Boltzmann nazwał hipotezą ergodyczną.

Aby przyjrzeć się, co się kryje za hipotezą ergodyczną, podzielmy powierzchnię stałej energii na drobne obszary. Niech średnia wartość $F(\Gamma)$ w obszarze i wynosi F_i, wtedy:

$$\frac{1}{T}\int_0^T F(\Gamma_i)dt \approx \sum_i \frac{\tau_i}{T} F_i,$$

gdzie τ_i/T jest ułamkiem czasu, jaki trajektorie fazowe przebywają w obszarze i dla czasu pomiędzy $t = 0$ i T. Posługując się hipotezą ergodyczną, można napisać

$$\frac{\tau_i}{T} = \frac{\mu_i}{\mu(S)},$$

gdzie μ_i jest miarą obszaru i, a $\mu(S)$ – miarą całej powierzchni o ustalonej energii $\mathscr{E}$. Zatem;

$$\bar{F}(\Gamma) = \sum_i \frac{\mu_i}{\mu(S)} F_i = \langle F(\Gamma)\rangle.$$

Tym samym potrafilibyśmy uzasadnić równowagową mechanikę statystyczną dla układu izolowanego, gdyby udało się udowodnić słuszność hipotezy ergodycznej dla wystarczająco dużej klasy układów fizycznych.

3. Twierdzenie ergodyczne dla jednej trajektorii.

W roku 1931 George Birkhoff udowodnił bardzo ważne twierdzenie pozwalające doprecyzować niektóre idee Boltzmanna oraz określić właściwości dynamiczne układu niezbędne, aby był on ergodyczny w sensie Boltzmanna.

Twierdzenie dotyczy właściwości pojedynczych trajektorii w przestrzeni Γ. Rozważmy układ dynamiczny, w którym określono miarę oraz pewną funkcję dynamiczną $F(\Gamma)$ zdefiniowaną na powierzchni stałej energii i spełniającą warunek

$$\int_{\mathscr{H}=\mathscr{E}} \mathrm{d}\mu |F(\Gamma)| < \infty.$$

(Twierdzenie ergodyczne Birkhoffa) *Granica nieskończonego czasu dla średniej czasowej*

$$\bar{F}(\Gamma) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathrm{d}t F(\Gamma_t)$$

istnieje niemal wszędzie na powierzchni stałej energii.

Jak łatwo zauważyć $\bar{F}(\Gamma)$ może zależeć jedynie od trajektorii, ale nie od wybranego dla niej punktu początkowego, gdyż

$$\begin{aligned} \bar{F}(\Gamma_{t_0}) &= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathrm{d}t F(\Gamma_{t_0+t}) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_{t_0}^{T+t_0} F(\Gamma_t) = \\ &= \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \left[\int_{t_0}^{0} F(\Gamma_t)\mathrm{d}t + \int_0^T F(\Gamma_t)\mathrm{d}t + \int_T^{T+t_0} F(\Gamma_t)\mathrm{d}t \right]. \end{aligned}$$

W granicy $T \to \infty$ wyraz pierwszy i trzeci znikają, a drugi dąży do $\bar{F}(\Gamma)$.

Tak więc długoczasowa średnia jest stała wzdłuż całej trajektorii $\forall_{t_0} \bar{F}(\Gamma) = \bar{F}(\Gamma_{t_0})$, zatem można zapisać:

$$\int \mathrm{d}\mu F(\Gamma) = \int \mathrm{d}\mu \bar{F}(\Gamma).$$

Twierdzenie Birkhoffa nie wystarcza do wykazania, że fizycznie ciekawe układy są ergodyczne w rozumieniu Boltzmanna, ponieważ średnia czasowa ciągle zależy od trajektorii i niekoniecznie równa jest średniej po zespole. Pozwala jednak zdefiniować układ spełniający hipotezę ergodyczną Boltzmanna.

Definicja: *Układ nazywamy ergodycznym, jeśli średnia czasowa funkcji* $\bar{F}(\Gamma)$ *jest stała na powierzchni stałej energii.*

Stałą tą oznaczymy $\tilde{F}$.

Układ jest ergodyczny, jeśli średnia czasowa wielkości dynamicznej jest w nim równa średniej mikrokanonicznej, ponieważ

$$\int \mathrm{d}\mu F(\Gamma) = \int \mathrm{d}\mu \bar{F}(\Gamma) = \tilde{F} \int \mathrm{d}\mu,$$

zatem:

$$\tilde{F} = \frac{\int \mathrm{d}\mu F(\Gamma)}{\int \mathrm{d}\mu} = \langle F(\Gamma) \rangle.$$

Co więcej, hipoteza Boltzmanna, że czas spędzany przez układ w danym obszarze na powierzchni stałej energii jest proporcjonalny do mikrokanonicznej miary obszaru, jest rzeczywiście spełniona dla układu ergodycznego. Weźmy za $F(\Gamma)$ funkcję charakterystyczną $\chi_i(\Gamma)$ obszaru i zdefiniowaną jako:

$$\chi_i(\Gamma) = \begin{cases} 1, & \text{jeśli } \Gamma \in \text{obszaru } i, \\ 0, & \text{jeśli } \Gamma \notin \text{obszaru } i. \end{cases}$$

Wówczas

$$\bar{\chi}(\Gamma) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \mathrm{d}t \chi_i(\Gamma_t) = \lim_{T\to\infty} \frac{\tau_i}{T},$$

co jest równe ułamkowi czasu, jaki układ spędza w obszarze i oraz:

$$\bar{\chi}(\Gamma) = \langle \chi(\Gamma) \rangle = \frac{\int \mathrm{d}\mu \chi_i(\Gamma)}{\int \mathrm{d}\mu} = \frac{\mu_i}{\mu(S)}.$$

4. Ergodyczność a całkowalność.

Jednym z przykładów układów nieergodycznych jest układ dwóch identycznych, sprzężonych oscylatorów harmonicznych:

$$\begin{cases} \ddot{s}_1 + \omega_0^2 s_1 = -k(s_1 - s_2) \\ \ddot{s}_2 + \omega_0^2 s_2 = -k(s_2 - s_1) \end{cases}$$

Układ ten ma dwa mody normalne: jeden, którym zmienne s_1 i s_2 oscylują w fazie, i drugi, w którym ich fazy są przeciwne. Jeśli układ zaczyna ruch w jednym z modów normalnych, to energia nigdy nie przechodzi do drugiego modu. Nie ma możliwości, żeby układ prowadził eksplorację całego zakresu dostępnych stanów o określonej energii.

Można pokazać, że hipoteza ergodyczna zawodzi dla tego układu, ponieważ jest on całkowalny; oprócz energii całkowitej istnieją inne wielkości, które są zachowane w trakcie ruchu i te dodatkowe prawa zachowania wykluczają eksplorację wszystkich stanów o zadanej energii.

Dokładnie rozwiązywalne równania ruchu zawsze mają dodatkowe całki ruchu. Istnienie nawet jednej dodatkowej całki ruchu wystarcza, aby ograniczyć układowi dostęp do wszystkich stanów o danej energii i unieważnić hipotezę ergodyczną.

Bibliografia

[1] *Wprowadzenie do teorii chaosu* – J. R. Dorfman

[2] *Podstawy fizyki statystycznej i termodynamiki* – A. I. Anselm

[3] *Zjawiska Krytyczne* – J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher, M. E. J. Newman